ХАРЬКОВСКИЙ ОРДЕНА ЛЕНИНА
И ОРДЕНА ОКТЯБРЬСКОЙ РЕВОЛЮЦИИ
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ АН УССР

ХФТИ 82-36

А.П.Ивашин, В.Д.Цуканов

О РЕЛАКСАЦИИ ПАРАМАГНИТНЫХ ПРИМЕСЕЙ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С ЭЛЕКТРОННЫМ ТЕРМОСТАТОМ

Харьков 1982

УДК 538.22

Ивашин А.П., Цуканов В.Д.

О РЕЛАКСАЦИИ ПАРАМАГНИТНЫХ ПРИМЕСЕЙ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С ЭЛЕКТРОННЫМ ТЕРМОСТАТОМ

Препринт ХФТИ АН УССР, ХФТИ 82-36, Харьков, 1982, 8 с.

Рассматриваются кинетические явления в системе парамагнитных примесей, взаимодействующих с электронным газом. Получено уравнение для кинетических коэффициентов, определяющих релаксацию примесей подсистемы. Для расчета кинетических коэффициентов использовано представление для корреляционных функций в виде континуального интеграла. В приближении короткого радиуса взаимодействия электронов и примесей получены выражения для декрементов затухания продольной и поперечной компонент спина примеси. (Список лит. - 3 назв.)

I. Система электронов, взаимодействующих с парамагнитными примесями, описывается k-примесными электронными матрицами плотности $\rho_k(x_1,\ldots, x_k)$ цепочка уравнений для которых имеет вид [I]

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} = i\left[\rho_k, H_k\right] + in \int dx_{k+1}\, tr_{k+1}\left[\rho_{k+1}, U(k+1)\right], \quad k=0,1,2\ldots$$

Здесь $H_k = H_0 + \sum_{j=1}^{k} U(j)$ – гамильтониан электронов, взаимодействующих с k примесями, $H_0 = \sum \varepsilon_p a^+_{p\alpha} a_{p\alpha}$ – оператор кинетической энергии электронов;

$$U(j) = \int dx\, \Psi^+_\alpha(x)\Psi_\beta(x)\left\{\varphi(x-x_j)\delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2}\vec{\tau}_{\alpha\beta}\vec{\sigma}^{(j)} J(x-x_j)\right\}$$

– оператор взаимодействия электронов с примесью, находящейся в точке x_j; τ, $\sigma^{(j)}$ – спиновые матрицы Паули электронов и j-й примеси (предполагается, что спин примеси равен $\frac{1}{2}$); $\varphi(x)$ – энергия потенциального взаимодействия электронв и примеси; $J(x)$ – электрон-примесный обменный интеграл; n – плотность примесей, tr_i – след в спиновом пространстве i-й примеси. Так как спин примеси равен $\frac{1}{2}$, то одноприсмесная матрица $w_1 = Sp\,\rho_1$ (Sp – след в пространстве электронных состояний) определяется только одним параметром – средним спином примеси $S: w_1 = \frac{1}{2} + \vec{\sigma}\vec{S}$. Поэтому на упрощенном этапе эволюции операторы ρ_k будут зависеть от времени через посредство электронной функции распределения $f_{p\alpha\beta} = Sp\rho_0 a^+_{p\beta} a_{p\alpha}$ (рассматривается пространственно однородный случай) и среднего спина примеси $\vec{S} = \frac{1}{2} tr\, w_1 \vec{\sigma}$. В этом случае с помощью стандартных методов сокращенного описания [2] для $\rho_k(t) = \rho_k\{f(t), S(t)\}$ можно получить следующие уравнения:

$$\rho_K=\int_{-\infty}^{0}d\tau e^{\tau(\eta+\dot{f}\frac{\partial}{\partial f}+\dot{S}\frac{\partial}{\partial S})}e^{iH_K\tau}\{\eta\rho^{(0)}w_K^{(0)}+$$

$$+in\int dx_{K+1}tr_{KH}[\rho_{K+1},U(K+1)]\}e^{-iH_K\tau},\quad K=0,1,2\dots;\qquad (I)$$

$$\dot{f}_{p\alpha\beta}=in\int dx\ tr\ Sp\,\rho_1[U(1),a^+_{p\beta}a_{p\alpha}];$$

$$S_i=\frac{1}{2}Sp\ tr\ \rho_1[H_1,\sigma_i];$$

$$w_K=\prod_{i=1}^{K}\left(\frac{1}{2}+\vec{\sigma}^{(i)}\vec{S}\right);$$

$$\rho^{(0)}=exp\{\Omega-\sum_{p\alpha\beta}\left(\ln\frac{1-f}{f}\right)_{p\alpha\beta}a^+_{p\alpha}a_{p\beta};\quad \Omega=\sum_{p\alpha}\{\ln(1-f)\}_{p\alpha,p\alpha}\qquad (2)$$

В формуле (2) f рассматривается как матрица с матричными элементами $f_{p\alpha,q\beta}=\delta_{pq}f_{p\alpha\beta}$.

Если плотность примесей достаточно мала, то в системе электронов за счет электрон-электронных либо электрон-фононных-столкновений сравнительно быстро установится состояние равновесия и дальнейшая эволюция будет состоять в релаксации примесных спинов. Поэтому, полагая $\dot{f}=0$ и опуская второе слагаемое в (I), для $\dot{S}_i$ найдем

$$\dot{S}_i=\frac{1}{2}\eta\left(\eta+\dot{S}\frac{\partial}{\partial S}\right)\int_{-\infty}^{0}d\tau e^{\tau(\eta+\dot{S}\frac{\partial}{\partial S})}Sp\,tr\,e^{iH_1\tau}\rho^{(0)}w_1\left[e^{-iH_1\tau},\sigma_i\right].$$

Отсюда, **записав** уравнения движения для спина в виде $\dot{S}_i=\alpha_{Ki}\delta S_K$, где $\delta S_K=S_K-S_{K0}$ – отклонение спина от равновесного значения S_{K0}, получим уравнение

$$\eta^2\int_{-\infty}^{0}d\tau e^{\eta\tau}Sp\,tr\,e^{iH_1\tau}\rho^{(0)}\left(\frac{1}{2}+\vec{S}_0\vec{\tau}\right)\left[e^{-iH_1\tau},\sigma_i\right]=0,$$

определяющее связь между равновесным значением функции распределения $f_{p\alpha\beta}$ и спином примеси $\vec{S}_0$, а также записанное в матричной форме уравнение для кинетических коэффициентов

$$\alpha=-\eta\int_{-\infty}^{0}d\tau e^{(\eta+\alpha)\tau}\frac{\partial}{\partial\tau}D(\tau),\qquad (3)$$

$$D_{ji}(\tau)=\frac{1}{4}\,Sp\,tr\,e^{iH_1\tau}\rho^{(0)}\sigma_j\left[e^{-iH_1\tau},\sigma_i\right]+\text{к.с.}\cdot \qquad (4)$$

2. В дальнейшем будем считать, что радиус электрон-примесного взаимодействия мал по сравнению с расстоянием между электронами, хотя само взаимодействие не мало. Для рассмотрения этого предельного случая удобно записать коррелятор $D_{ji}(\tau)$ в терминах амплитуд рассеяния электронов на примесях. Так как $[\rho^{(0)}, H_0]=0$, то в формуле (4) операторы $e^{iH_1\tau}$, $e^{-iH_1\tau}$ можно заменить соответственно на

$$\mathcal{U}(\tau)=e^{iH_1\tau}e^{-iH_0\tau}, \quad \mathcal{U}^+(\tau)=e^{iH_0\tau}e^{-iH_1\tau}.$$

Тогда, сопоставляя операторам $\mathcal{U}(\tau)$, $\mathcal{U}^+(\tau)$, $\rho^{(0)}$ функционалы матричной (M) формы этих операторов [3], след по электронным состояниям в (4) можно записать в виде следующего континуального интеграла:

$$Sp\,\mathcal{U}(\tau)\rho^{(0)}\sigma_j[\mathcal{U}^+(\tau),\sigma_i]=\int\prod_{i=1}^{3}Du^{(i)*}Du^{(i)}\exp\{u^{(1)*}u^{(1)}-u^{(2)*}u^{(2)}-u^{(3)*}u^{(3)}\}\cdot$$
$$\mathcal{U}(u^{(1)*},u^{(2)})\,\rho^{(0)}(u^{(2)*},u^{(3)})\sigma_j[\mathcal{U}^+(u^{(3)*},u^{(1)})\sigma_i],$$
$$u^{(i)*}u^{(j)}\equiv\sum_{p\alpha}u^{(i)*}_{p\alpha}\,u^{(j)}_{p\alpha}, \qquad (5)$$

где функционал M-формы произвольного оператора A определяется формулой

$$A(u^*,u)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(n!)^2}\sum_{\substack{1\ldots n\\ 1'\ldots n'}}u^*_1\ldots u^*_n A_{1\ldots n,1'\ldots n'}u_{n'}\ldots u_{1'}. \qquad (6)$$

В случае статистики Ферми функциональные аргументы u^*, u являются антикоммутирующими параметрами, а матричные элементы от оператора A берутся между антисимметричными собственными функциями свободного гамильтониана.

Согласно формулам (2), (6) функционал M-формы оператора $\rho^{(0)}$ будет иметь вид

$$\rho^{(0)}(u^*,u)=\exp\{\Omega+u^*\gamma u\}, \qquad (7)$$

где $Y_{12} = \left(f(1-f)^{-1}\right)_{12}$, $u^* Y u \equiv \sum_{12} u_1^* Y_{12} u_2$. Здесь и в дальнейшем индексы обозначают совокупность импульсных и спиновых переменных: $1 \equiv \{ p_1, \alpha_1 \}$.

Функционал M-формы оператора $\mathcal{U}(\tau)$ удобно записать в терминах **связных** частей $g^{(n)}(\tau)$ операторов $\mathcal{U}^{(n)} \equiv e^{iH_1^{(n)}\tau} e^{-iH_0^{(n)}\tau}$, определяемых с помощью соотношений:

$$\mathcal{U}^{(0)}(\tau) = 1 , \quad \mathcal{U}^{(1)}(\tau) = 1 + g^{(1)}(\tau) ,$$

$$\mathcal{U}^{(2)}(\tau) = 1 + \overset{1}{g}{}^{(1)}(\tau) + \overset{2}{g}{}^{(1)}(\tau) + \overset{12}{g}{}^{(2)}(\tau) , \tag{8}$$

$$\mathcal{U}^{(3)}(\tau) = 1 + \overset{1}{g}{}^{(1)}(\tau) + \overset{2}{g}{}^{(1)}(\tau) + \overset{3}{g}{}^{(1)}(\tau) + \overset{12}{g}{}^{(2)}(\tau) + \overset{13}{g}{}^{(2)}(\tau) + \overset{23}{g}{}^{(2)}(\tau) + g^{(3)}(\tau) ,$$

. . . .

При необходимости индексами над операторами обозначены электроны, в пространстве которых действуют соответствующие операторы. Подчеркнем, что $g^{(n)}$ является n - электронным оператором, действующим также в спиновом пространстве примеси.

Из формул (6), (8) найдем

$$\mathcal{U}(u^*, u) = e^{u^* u} \{ 1 + g(u^*, u) \} , \quad \mathcal{U}^+(u^*, u) = e^{u^* u} \{ 1 + g^+(u^*, u) \} ,$$

где

$$g(u^*, u) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n!)^2} u_1^* \dots u_n^* g^{(n)}_{1 \dots n, 1' \dots n'} u_{n'} \dots u_{1'} \tag{9}$$

- функционал связных частей $g^{(n)}(\tau)$ и $g^+(u^*, u)$ - функционал связных частей $g^{(n)+}(\tau)$.

Подставляя (5), (7), (9) в (4), получаем

$$D_{ji}(\tau) = \frac{1}{4} e^{\Omega} \operatorname{tr} \sigma_j \int \prod_{i=1}^{3} D u^{(i)*} D u^{(i)} e^{Q(u^*, u)} \cdot$$

$$\left[g^+(u^{(3)*}, u^{(1)}), \sigma_i \right] \{ 1 + g(u^{(1)*}, u^{(2)}) \} ,$$

$$Q(u^*, u) = u^{(1)*} u^{(1)} - u^{(2)*} u^{(2)} + u^{(2)*} Y u^{(3)} - u^{(3)*} u^{(3)} + u^{(1)*} u^{(2)} + u^{(3)*} u^{(1)} . \tag{10}$$

С помощью замены переменных $\{u^{(2)*}, u^{(2)}, u^{(3)*}, u^{(3)}\} \to \{V^*, V, V^{(1)*}, V^{(1)}\}$, где

$$u^{(2)} = Y(u^{(1)} + V), \qquad u^{(2)*} = u^{(1)*} + V^* + V^{(1)*},$$

$$u^{(3)} = u^{(1)} + V + V^{(1)}, \qquad u^{(3)*} = (u^{(1)*} + V^*)Y,$$

квадратичная форма Q приводится к диагональному виду:

$$Q = u^{(1)*}(1+Y)u^{(1)} - V^* Y V + V^{(1)*} Y V^{(1)}. \tag{11}$$

Таким образом, подставляя (11) в (10) и интегрируя по $V^{(1)*}$, $V^{(1)}$, получаем

$$D_{ji}(\tau) = \frac{1}{4} e^{\Omega'} tr\, \sigma_j \int Du^* Du DV^* DV \exp\{u^*(1+Y)u - V^* Y V\} \times$$
$$\times [g^+(\tilde{V}^*, u), \sigma_i]\{1 + g(u^*, \tilde{V})\} + \text{к.с.};$$

$$\tilde{V} = Y(u + V), \qquad \tilde{V}^* = (u^* + V^*)Y, \tag{12}$$

где

$$\Omega' = \Omega + \sum_{p\alpha} \left(\ln \frac{(1-f)}{f}\right)_{p\alpha, p\alpha}.$$

3. При вычислении континуального интеграла (2) операторы $g^{(n)}(\tau)$, $g^{(n)+}(\tau)$ будем рассматривать как возмущение. Интегрирование при этом сводится к расстановке следующих связей:

$$\langle u_1^* u_2 \rangle = (1-f)_{21}, \qquad \langle \tilde{V}_1 \tilde{V}_2^* \rangle = f_{12},$$

$$\langle u_1^* \tilde{V}_2 \rangle = f_{21}, \qquad \langle \tilde{V}_1^* u_2 \rangle = f_{21}.$$

Рассматривая формально операторы $g^{(n)}$ как величины n-порядка малости, представим коррелятор $D_{ji}(\tau)$ и коэффициенты (3) в виде рядов

$$D_{ji}(\tau) = \sum_{e=1}^{\infty} D_{ji}^{(e)}(\tau), \qquad \alpha_{ji} = \sum_{e=1}^{\infty} \alpha_{ji}^{(e)}. \tag{13}$$

В отличие от обычной теории возмущений члены ряда (13) описывают процессы с участием все большего числа электронов. Поэто-

му ведущие асимптотики этих членов по плотности падают с ростом e .

При $e = 1,2$ из (I3) имеем

$$D^{(1)}_{ji} = \frac{1}{4} \operatorname{tr} \sigma_j \sum_{12} \left[g^{+}_{12} \sigma_i \right] f_{21} + \text{к.с.},$$

$$D^{(2)}_{ji} = \frac{1}{4} \operatorname{tr} \sigma_j \Big\{ \sum \left[g^{+}_{12} \sigma_i \right] (1-f)_{23} g_{34} f_{41} + \sum \left[g^{+}_{12} \sigma_i \right] f_{21} g_{34} f_{43} +$$

$$+ \frac{1}{2} \left[g^{+}_{12,34} \sigma_i \right] f_{31} f_{42} \Big\} + \text{к.с.} \equiv A_{1ji} + A_{2ji} + A_{3ji}, \qquad (I4)$$

$$\alpha^{(1)} = \eta^2 \int_{-\infty}^{0} d\tau e^{\eta\tau} D^{(1)}, \quad \alpha^{(2)} = \eta^2 \int_{-\infty}^{0} d\tau e^{\eta\tau} D^{(2)} - \frac{1}{\eta} \alpha^{(1)^2} + \alpha^{(1)} \frac{\partial \alpha^{(1)}}{\partial \eta}. \qquad (I5)$$

Согласно (8) $\quad \int_{-\infty}^{0} d\tau e^{\eta\tau} g^{(1)}_{12}(\tau) = i\, C_{12}(\varepsilon_2 + i\eta),$

где $C(w)$ – связная часть резольвенты $R = (w - H^{(1)}_1)^{-1}$. В силу уравнения $R(w) = R_0(w) + R_0(w) T(w) R_0(w)$, оператор

$$C(w) = R_0(w)\, T(w)\, R_0(w). \qquad (I6)$$

Здесь $H^{(1)}_1$ –гамильтониан электрона, взаимодействующего с примесью, $R_0(w)$ – резольвента свободного электрона, $T(w)$– амплитуда рассеяния электрона на примеси.

Разлагая функцию распределения f и амплитуду T по матрицам Паули

$$f = \overset{\circ}{f} + \vec{\tau} \vec{f}, \qquad T(w) = a(w) + \frac{1}{2} \vec{\tau} \vec{\sigma}\, b(w),$$

$$\overset{\circ}{f} = \frac{1}{2} \operatorname{tr} f, \qquad \vec{f} = \frac{1}{2} \operatorname{tr} \vec{\tau} f \qquad (I7)$$

и используя (I4), (I6), (I7), получаем

$$\alpha^{(1)}_{ji} = 2\varepsilon_{jie} \sum_p b^{(\varepsilon_p)}_{pp} f^{e}_{p}, \qquad b^{(\varepsilon_p)}_{pp} = \operatorname{Re} \lim_{\eta \to +0} b_{pp}(\varepsilon_p + i\eta),$$

где $b(\omega) \equiv T_{+-,-+}(\omega)$ – амплитуда рассеяния с переворотами спинов.

Функция распределения f_p заметно отлична от нуля лишь при $p \leq \lambda^{-1} \ll r_0^{-1}$ (λ – дебройлевская длина волны электрона, r_0 – радиус электрон-примесного взаимодействия). Поэтому в главном приближении по плотности

$$\alpha^{(1)}_{ji} = 2\varepsilon_{jie}\, b \sum_p f^e_p , \qquad b = b_{pp}(\varepsilon_p)/_{p=0} . \qquad (18)$$

В силу коммутационных соотношений $[\sigma_i \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ije}\sigma_e$ величина A_{3ji} в (15) пропорциональна $\varepsilon_{jie} f^e$. Этот член можно опустить, так как оператор $g^{(2)}$, описывающий двухэлектронное рассеяние на примеси, может привести к поправке более высокой степени чем (18). Слагаемое A_{2ji} содержит несвязные электронные суммы $\sum g^+_{12} f_{21}$, $\sum g_{34} f_{43}$, что приводит после интегрирования по τ к появлению сингулярной частью опущенного нами слагаемого A_{3ji}.

При вычислении $\alpha^{(2)}$ воспользуемся формулой

$$\int_{-\infty}^{0} d\tau e^{\eta\tau} g^+_{12}(\tau) g_{34}(\tau) = \frac{1}{2\pi}\int dE\, C_{12}\left(E+\varepsilon_2+\frac{i}{2}\eta\right) C_{34}\left(E+\varepsilon_3-\frac{i}{2}\eta\right),$$

тогда, опуская прецессионные члены и переходя к пределу $\eta \to +0$, найдем в главном приближении диссипативную часть коэффициента α :

$$\alpha^{(2)}_{ji} = 4\pi b^2 \sum_{12} \delta(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\left\{ \mathring{f}_1 (\mathring{f}_2 - 1)\delta_{ij} - f^j_1 f^i_2 \right\} . \qquad (19)$$

Будем считать, что равновесная поляризация электронов и примесей обусловлена наличием внешнего однородного магнитного поля $\vec{B}$. Подставляя в (19) равновесную функцию распределения

$$\hat{f}_p = \left\{ \exp \beta(\varepsilon_p - \mu + \mu_0 \vec{\tau}\vec{B}) + 1 \right\}^{-1} ,$$

где μ – химический потенциал электронов, μ_0 – магнетон Бора, β^{-1} – температура, и считая, что $\mu \gg \beta^{-1}$, получаем

$$\alpha_{ji} = -\frac{8(\bar{b}\, p_F)^2}{\pi}\beta^{-1}\left\{ \beta\mu_0 B \,\mathrm{cth}\, \beta\mu_0 B (\delta_{ij} + n_i n_j) + \delta_{ij} - n_i n_j \right\}, \quad n_i \equiv \frac{B_i}{B},$$

где $\bar{b} \equiv \frac{mVb}{4\pi}$ – длина рассеяния электрона на примеси с переворотом спинов, m – масса электрона, P_F – фермиевский импульс, V – объем системы. Отсюда находим декременты затухания продольной и поперечной компонент спина

$$\gamma_{\parallel} = \frac{16(\bar{b} P_F)^2}{\pi} \mu_0 B \operatorname{cth} \beta \mu_0 B, \quad \gamma_{\perp} = \frac{8(\bar{b} P_F)^2}{\pi} (\beta^{-1} + \mu_0 B \operatorname{cth} \beta \mu_0 B),$$

а из (I8) поправку к внешнему магнитному полю $\delta B_e = \frac{1}{2} \bar{b} P_F B_e$.

В заключение авторы благодарят С.В.Пелетминского за внимание к работе и обсуждение результатов.

ПРИКНИЖНЫЙ БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

I. Красильников В.В., Цуканов В.Д., Яценко А.А. Кинетические уравнения для электронных систем с парамагнитными примесями. – ТМФ, 1974, т.20, № I, с.133.
2. Ахиезер А.И., Пелетминский С.В. Методы статистической физики, М.: Наука, 1977.
3. Березин Ф.А. Метод вторичного квантования. М.: Наука, 1965.

Анатолий Петрович Ивашин, Виктор Денисович Цуканов

О РЕЛАКСАЦИИ ПАРАМАГНИТНЫХ ПРИМЕСЕЙ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С ЭЛЕКТРОННЫМ ТЕРМОСТАТОМ

Ответственные за выпуск А.П.Ивашин, Л.М.Ракивненко
Редактор, корректор Е.Г.Белоусова

Подписано в печать 16.06.82. Т-13313. Формат 60х84/16.
Бум.писчая № I. Офсетн. печ. 0,5 усл.п.л. 0,4 уч.-изд.л.
Тираж 200. Заказ 532. Цена 6 коп. Индекс 3624.

Харьков-108, ротапринт ХФТИ АН УССР

6 коп.

Индекс 3624

Препринт ХФТИ 82-36, Харьков, 1982, 1-8.